18.不規則系のホール効果 : 混晶(「第2回液体金属の物性と構造に関する研究討論会」,研究会報告)

福山, 秀敏

18. 不規則系のホール効果：混晶[*)][**)]

東大理　福山秀敏

不規則系に於ける電子状態に関する議論は，状態密度に対するものが第一であるが，これらの議論に用いられているモデル及び近似の範囲での輸送現象の研究は近似の意味を知るためにも有用である。種々の輸送係数のうちホール係数は不純物伝導を最初に示唆したものであり，電子状態を探る重要な効果であるが，最近，その一般論が展開された。[1)] それによれば，不規則系の一つの例である液体金属のうち nearly－free－electron（NFE）のモデルとして扱える系に於ても，ホール係数が自由電子の場合とは異なり得るが，反面このモデルがそのまま適用出来そうにもない液体金属が存在する。Hg のように固体の時に存在していたバンド・ギャップの痕跡が残っている場合がそれであるが，このような系に於ける輸送現象の研究の足がかりとして

$$\mathscr{H} = \Sigma\ t_{ij}\ a_i^+ a_j + \Sigma\ \varepsilon_i\, a_i^+ a_i \qquad (1)$$

で表わされる二元合金の性質を調べた。勿論，（1）がそのまま多価の液体金属に適用出来るわけではないが，Hg 等に対する可能な考え方の基礎を与える。

式（1）で表わされる系の輸送現象，とくにホール効果はそれ自体，この効果の符号の問題の理解には興味深い。著者ら[2)]は以前

$$\mathscr{H} = \frac{p^2}{2m} + \sum_{\ell} v_0\,\delta(r - R_\ell) \quad (v_0 < 0) \qquad (2)$$

で表わされる系に於て，Klauder[3)] 及び Yonezawa[4)] が行なった近似の範囲でのホール効果を調べたが，その際，いかなる濃度及び温度の条件の下でも，不純物帯領域に於てホール効果の符号が電子的である事を示した。この議論に際

---

*）一部分は Prof. Y.Wada により日ソ低温物理学会議（Novosibirsk, 1969）で報告された。

**）"Hall Effect and Orbital Magnetism of Binary Alloys" (to be submitted to Prog. Theor. Phys.)

しては，不純物の濃度が十分小さいとしたが，もし，この“不純物”の濃度が増し，“host”の原子の濃度と同じ程度になれば，当然，通常のブロッホ・バンドに於けると同様，符号が変化してよいはずである。この事情の移り変わりが式（1）のモデルで理解出来るはずである。

不規則系に対する近似として，どの程度良いか不明であるが，[5] 議論を coherent－potential の近似[6]（Onodera－Toyozawa 近似[7]）に限る。この近似の範囲では，電流に対する vertex corrections はきかないので，

$$\sigma_{xx} = \frac{2e^2}{\pi} \sum_{k} \int dE \left(-\frac{\partial f}{\partial E}\right) \cdot \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x}\right)^2 \cdot \left(\mathrm{Im}\, G^R(k,E)\right)^2 \tag{3}$$

$$\sigma_{xy} = \frac{4e^3H}{3\pi c} \sum_{k} \int dE \frac{\partial f}{\partial E} \left[\left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x}\right)^2 \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_y^2} - \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x} \frac{\partial \varepsilon}{\partial k_y} \frac{\partial^2 \varepsilon}{\partial k_x \partial k_y} \right] \times \left[\mathrm{Im}\, G^R(k,E)\right]^3 \tag{4}$$

ここで $\varepsilon(k)$ は t_{ij} の Fourier 変換，また，G^R は一体の retarded グリーン函数である。結晶形としては，simple cubic type を考えるが，$\varepsilon(k)$ の k－依存性をそのまま取扱うのは複雑なので，次の近似を行なう。

$$\frac{1}{N} \sum_{k} \delta(E-\varepsilon(k)) = \frac{2}{\pi V_0} \left[1-\left(\frac{E}{V_0}\right)^2\right]^{1/2} \tag{5}$$

$$\sum_{k} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x}\right)^2 \delta(E-\varepsilon(k)) = \frac{v^2}{3\pi V_0} \left[1-\left(\frac{E}{V_0}\right)^2\right]^{3/2} \tag{6}$$

$$\sum_{k} \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_x}\right)^2 \left(\frac{\partial \varepsilon}{\partial k_y}\right)^2 \delta(E-\varepsilon(k)) = \frac{v^4}{30\pi V_0} \left[1-\left(\frac{E}{V_0}\right)^2\right]^{5/2} \tag{7}$$

ここで，V_0 はバンド巾の半分，v は速さの次元を持つ量。上の近似より

$$\sigma_{xx} = \frac{4e^2v^2}{3\pi V_0^2} L \tag{8}$$

$$L = Z''^2 - \frac{1}{2} \mathrm{Re}\,\tau_0 (1+Z) \left\{ \frac{1-Z^2}{Z''} + 3iZ \right\} \tag{9}$$

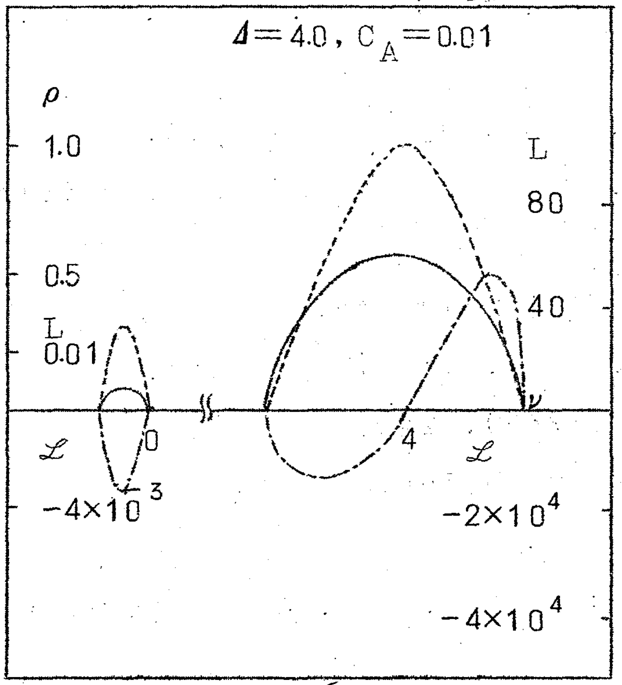
$$\sigma_{xy} = -\frac{e^3 H v^4}{12\pi c V_0^4}\mathscr{L} \tag{10}$$

$$\mathscr{L} = R_e \tau_0 (1+Z)\left\{\frac{Z(1-Z^2)}{Z''^2} - i\frac{1}{Z''}\cdot(1-4Z^2) + \frac{(3-4Z^2)}{1-Z^2}Z\right\} \tag{11}$$

$$Z = (\mu - \Sigma(\mu + i\delta))/V_0 \equiv Z' + iZ'' \tag{12}$$

$$\tau_0 = \left[(1-Z)/(1+Z)\right]^{1/2} \quad (I_m \tau_0 > 0) \tag{13}$$

これらを数値計算したもののうち，一部分が図1，2である。エネルギー的に低い方のバンドの上端で σ_{xy} が正となる場合は二種類の原子の比率及びその原子のエネルギー準位の間隔（△）に依存するが，それは式（11）の解析的な性質により，図3に示されるようになる。即ち，Ⅰ，Ⅱ，Ⅲ は全て persistence type の場合に属するが，Ⅰではエネルギー的に低い方にあるバンドの到る所で σ_{xy} は負，Ⅲ では高い方にあるバンドの到る所で正である。$4C_A C_B \geqq \Delta^2$ で表わされる領域Ⅱでは二つの各々のバンド内でホール係数は符号を変え，この意味でブロッホ・バンド的になっている。この，局在電子とブロッホ電子の特徴の共存は軌道磁性にも反映されている。



Eig. 1

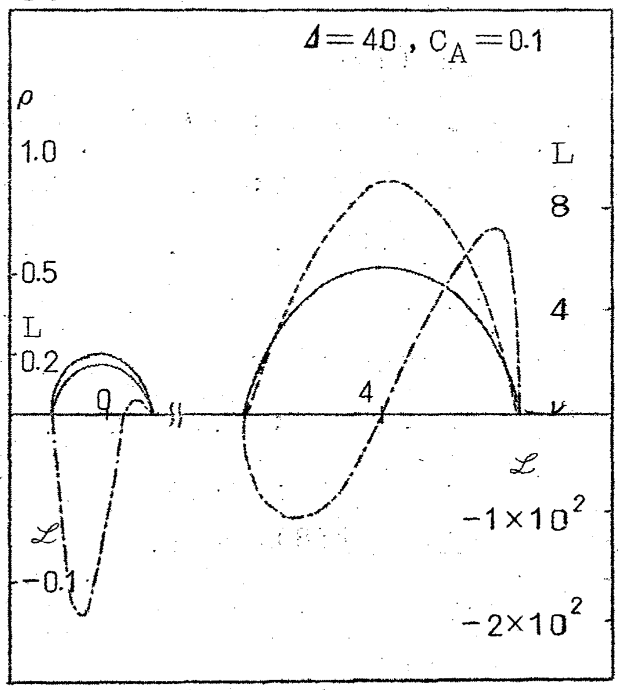


Fig. 2

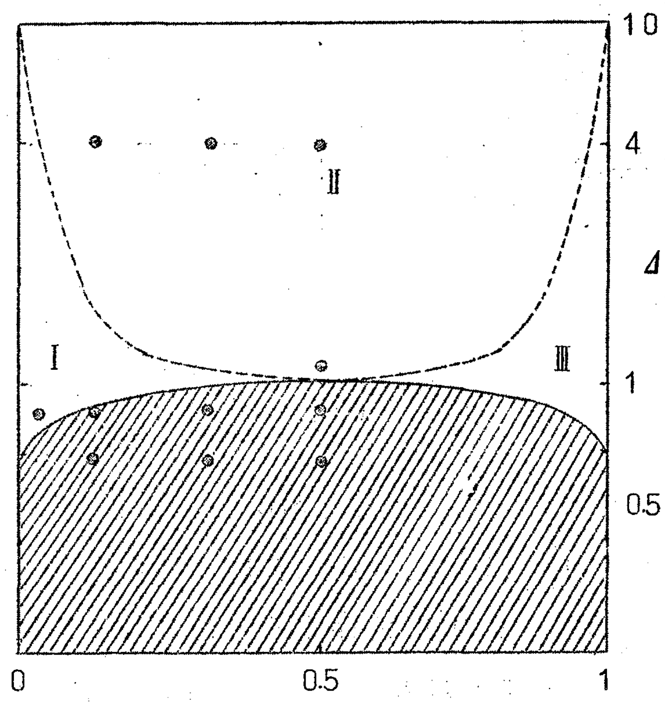


Fig. 3

文　　献

1) H.Fukuyama, H.Ebisawa and Y.Wada; Prog. Theor. Phys. 42 (1969), 494.
H.Fukuyama; Prog. Theor. Phys. 42 (1969) no.6.

2) H.Fukuyama; M.Saitoh, Y.Uemura and H.Shiba, submitted to J.Phys. Soc. Japan.

3) J.R.Klauder; Ann. Phys. 14 (1961), 43.

4) F.Yonezawa; Prog. Theor. Phys. 31 (1964), 357.

5) J.M.Ziman; J.Phys. C. 2 (1969), 230.

6) B.Velicky, S.Kirkpatrick and H.Ehrenreich; Phys. Rev. 175 (1968), 747.

7) Y.Onodera and Y.Toyozawa; J.Phys. Soc. Japan 24 (1968), 341.